Besprechung am 19.01.2024

Übungsblatt 10

1) Trägheitstensor und Trägheitsmoment

a) Berechnen Sie den Trägheitstensor für das folgende Molekül.

$$r_{BF} = 1.295 \text{ Å}$$
 $\theta_{FBF} = 120^{\circ}$

b) Berechnen Sie das Trägheitsmoment bezüglich der Hauptdrehachse für das folgende Molekül.

$$r_{so} = 1.431 \text{ Å}$$

 $\theta_{oso} = 119.3^{\circ}$

2) Rotationsspektroskopie zweiatomiger Moleküle

Die Bindungslänge des Jodwasserstoff-Moleküls (¹H-¹²⁷I) beträgt R_{HI} = 161 pm.

- a. Berechnen Sie das Trägheitsmoment senkrecht zur Bindungsachse und die Rotationskonstante \tilde{B} .
- b. Identifizieren Sie den Übergang der die höchste Intensität aufweist bei einer Temperatur von 300 K ($k_BT/hc = 208,5 \text{ cm}^{-1}$).
- c. Ermitteln Sie die Wellenzahl des Übergangs $J = 11 \leftarrow 10$ unter der Annahme, dass das Molekül als starrer Rotator betrachtet werden kann.

3) Rotationsspektroskopie zweiatomiger Moleküle

Im Rahmen eines Raumfahrtprogramms soll die Saturn-Atmosphäre auf CO untersucht werden. Dabei wurde eine Raumsonde mit einer Mikrowellenapparatur ausgestattet, um CO über Rotationslinien nachzuweisen.

Nehmen Sie das Modell des starren Rotators an!

a) Bei welchen Wellenzahlen liegen die ersten vier Rotationsübergänge für ¹²C¹⁶O bei einer Bindungslänge von 112,82 pm?

Besprechung am 19.01.2024

- b) Um die relative Häufigkeit des ¹³C-Isotops bestimmen zu können, muss der 0←1-Übergang der entsprechenden Moleküle noch aufgelöst werden können. In welchem (spektralen) Abstand muss das Spektrometer Signale detektieren können, damit die Absorptionslinien von ¹²C¹6O und ¹³C¹6O getrennt voneinander sichtbar sind.
- c) Wie könnte man das Experiment auch noch auf eine Abschätzung der Atmosphärentemperatur des Saturns ausdehnen?